

## Изучение процессов переполяризации в сегнетоэлектрических полимерных материалах методами компьютерного моделирования

Р.А. Герасимов<sup>1</sup>, В.И. Егоров<sup>2</sup>, О.Г. Максимова<sup>2</sup>, Т.О. Петрова<sup>1</sup>, А.В. Максимов<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Южный федеральный университет, 344006, Ростов-на-Дону, Россия  
roman-gerasimoff@yandex.ru

<sup>2</sup>Череповецкий государственный университет, 162600, Череповец, Россия

Для дискретной модели, описывающей сегнетоэлектрический полимер, проведено компьютерное моделирование процессов переполяризации в зависимости от параметров внешнего электрического поля и энергетических констант модели. Показано, что при определенной частоте внешнего излучения существует максимум поглощательной способности системы.

## Study of the processes of repolarization in ferroelectric polymer materials using computer simulation methods

R.A. Gerasimov<sup>1</sup>, V.I. Egorov<sup>2</sup>, O.G. Maksimova<sup>2</sup>, T.O. Petrova<sup>1</sup>, A.V. Maksimov<sup>2</sup>

<sup>1</sup> Southern Federal University, 105/42 Bolshaya Sadovaya Str., Rostov-on-Don, 344006, Russia

<sup>2</sup> Cherepovets State University, 5 Lunacharskii Av., Cherepovets, 162600, Russia

For a discrete model which describes a ferroelectric polymer, we perform computer simulation of the repolarization processes in dependence on the parameters of the external electric field and the energy constants of the model. We have shown that at the certain frequency the maximum of the absorbing capacity of the system exist.

Для описания взаимодействий между сегментами полимерных цепей в данной модели был использован потенциал Штокмайера, представляющий собой потенциал Леннарда-Джонса с дополнительным слагаемым, учитывающим дипольные взаимодействия между ближайшими сегментами (энергия Кеезома). Методом Монте-Карло с применением алгоритма Метрополиса при заданной температуре на каждом шаге изменения внешнего электрического поля определена равновесная конфигурация системы. Построены зависимости параметра дальнего порядка и среднего межцепного расстояния от величины внешнего электрического поля при различных значениях температуры и глубины  $\varepsilon$  потенциальной ямы энергии Леннарда-Джонса (Рис. 1, 2).

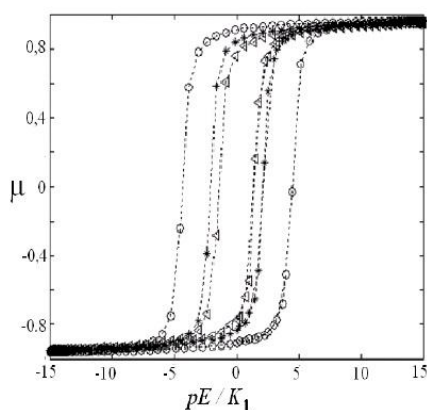


Рисунок 1. Зависимости параметра дальнего ориентационного порядка  $\mu$  от величины внешнего электрического поля  $pE/K_1$  при различных значениях относительной глубины потенциальной ямы  $\varepsilon/K_1 = 0,01$  (o),  $0,1$  (\*),  $1$  ( $\Delta$ ).

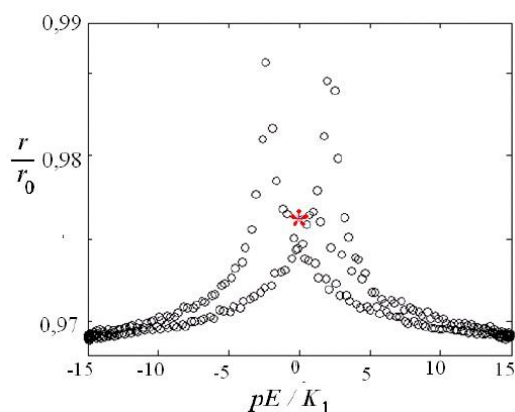


Рисунок 2. Зависимость относительной поперечной деформации системы  $r/r_0$  от величины внешнего электрического поля  $pE/K_1$ , где  $r_0$  – первоначальная толщина системы  $p$  – дипольный момент сегмента цепи.

Исследовано влияние температуры, параметров внешнего электрического поля (частоты и амплитуды), а также энергетических констант внутри- ( $K_1$ ) и междцепных ( $K_2$ ) взаимодействий на площадь кривой гистерезиса, определяющей коэффициент поглощения системой энергии электромагнитного излучения.

Показано, что для сегнетоэлектрических систем существует частота внешнего поля, на которую приходится максимум поглощательной способности системы. Результаты моделирования качественно согласуются с экспериментальными данными, полученными при исследованиях процессов переполяризации в сегнетоэлектриках [1].

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ «Методы микроструктурного нелинейного анализа, волновой динамики и механики композитов в исследовании и дизайне современных метаматериалов и элементов конструкций на их основе» (№ 15-19-10008).

1. E. Burcsu, G. Ravichandran, K. Bhattacharya *Appl. Phys. Lett.*, **77**, 1698 (2000).